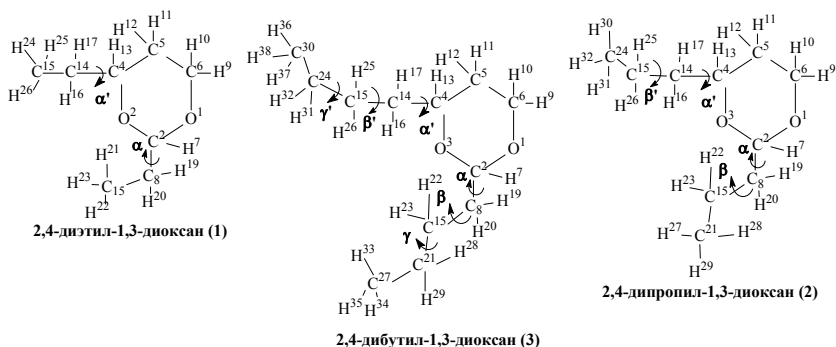


КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ 2,4-ДИАЛКИЛ-1,3- ДИОКСАНОВ

Гадзовский Д.И., Шепелевич И.С.

Башкирский государственный университет, Уфа

С использованием квантово-химических методов проведен конформационный анализ 2,4-диалкил-1,3-диоксанов, образующихся в результате взаимодействия двух молекул альдегида с этиленом.



Расчеты проводились последовательно в приближениях RHF/PM3, RHF/3-21G(d',p), RHF/6-31G(d',p), B3LYP/6-31G(d',p). В табл.1 приведены термодинамические характеристики наиболее устойчивых конформеров, рассчитанных методами RHF/PM3 и B3LYP/6-31G(d',p).

Таблица 1.Геометрические и термодинамические характеристики 1,3-диоксанов **1-3**

1,3-диоксан	Диэдральные углы, град.						ΔS	$-\Delta H$	$-\Delta G$
	α	α'	β	β'	γ	γ'	Дж/мольК	кДж/моль	кДж/моль
RHF/PM3									
1	41	41					434.154	171454.1	171583.5
2	41	41	-179	-178			492.661	200168.9	200315.7
3	41	42	-178	-170	74	65	550.339	228880.6	229044.7
B3LYP/6-31G(d',p)									
1	-56	-57					423.309	1220362.	1220488.5
2	56	55	179	178			482.656	1426705.0	1426848.8
3	178	-179	-174	-178	-179	-180	527.851	1633041.0	1633198.3